

рис.2. Температурные зависимости общей проводимости LM от парциального давления кислорода  $P_{O_2}$  (пунктирными линиями обозначены теоретические тангенсы угла наклона прямой для электронной и дырочной проводимости)

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки РФ.

Список публикаций:

[1] Yu J., Chao M., Li D., Li M., Wu H., Fu L., Chen H. // *Advanced Materials Research*. 2012. V. 557-559. P. 1223.

## Траектории фаз в кристаллизующихся керамических расплавах

**Парфенова Мария Дмитриевна**

*Зеленая Анна Эдуардовна, Луцык Василий Иванович*

*Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники*

*Луцык Василий Иванович, д.х.н.*

[vluts@ipms.bscnet.ru](mailto:vluts@ipms.bscnet.ru)

Разработка пространственных компьютерных моделей фазовых диаграмм позволяет не только воссоздать геометрическую конструкцию изучаемых керамических систем, но и является источником получения информации об этапах кристаллизации и формирования микроструктуры, дает возможность качественно и количественно оценивать соотношения фаз и конгломератов фаз (двойных и тройных эвтектик) для заданного состава. При помощи диаграмм вертикального материального баланса, позволяющих проанализировать этапы кристаллизации для заданного центра масс во всем интервале температур, производится анализ концентрационных полей различной размерности, получаемых при проецировании всех элементов фазовой диаграммы на концентрационный симплекс.

В качестве примера рассмотрим фазовую диаграммы псевдотройной системы  $Mg_2SiO_4$ - $CaAl_2Si_2O_8$ - $SiO_2$  (A-B-C) [1-2], содержащую область расслоения двух жидкостей и пять поверхностей ликвидуса соответствующих исходным компонентам ( $Mg_2SiO_4$ ,  $CaAl_2Si_2O_8$ ,  $SiO_2$ ), инконгруэнтному соединению ( $MgSiO_3=R$ ), области шпинели ( $MgAl_2O_4=S$ ) и двум полиморфным модификациям  $SiO_2$  (кristобалит=C1 и тридимит=C2). Характеризуется 4-мя невариантными превращениями: эвтектическим ( $E: LE \rightarrow B+C_2+R$ ), двумя квазиперитектическими ( $Q1: LQ1+S \rightarrow A+B$  и  $Q2: LQ2+A \rightarrow B+R$ ) и метатектическим ( $V: C1 \rightarrow C_2+R+L$ , соответствующее переходу от высокотемпературной (C1) к низкотемпературной (C2) полиморфной модификации кремнезема в присутствии расплава и соединения R. модель фазовой диаграммы сформирована куполом расслаивания (i), 5 поверхностями ликвидуса (q), 23 линейчатыми поверхностями ( $3ir+17qr+3vr$ ), 4 горизонтальными комплексами (h) при температурах невариантных точек (E, Q1, Q2, V), 8 двухфазных областей и 11 трехфазных областей (рис. 1а).

Рассмотрим этапы кристаллизации для состава  $G(0.199; 0.687; 0.114)$  расположенного в двумерном поле  $BQ_2I$  симплекса BCR. Как видно из диаграммы вертикального материального баланса центр масс G пересекает 4 фазовые области ( $L+B$ ,  $L+A+B$ ,  $L+B+R$ ,  $B+C+R$ ) и два горизонтальных комплекса при температурах невариантных точек  $Q_2$  и E (рис. 1б). После протекания реакции первичной кристаллизации  $L^1 \rightarrow B_1^1$  в фазовой области  $L+B$ , состав попадет в фазовую область  $L+A+B$ , где протекает моновариантная эвтектическая кристаллизация  $L^e \rightarrow A^{e(B)} + B^{e(A)}$ .

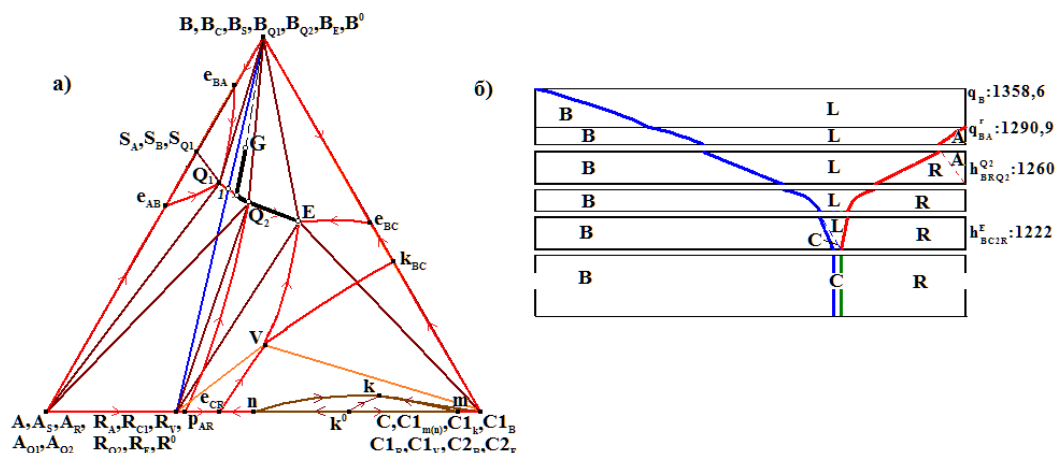


рис. 1. XY проекция системы  $Mg_2SiO_4$ - $CaAl_2Si_2O_8$ - $SiO_2$  (A-B-C) с траекториями расплава (а) и диаграмма вертикального материального баланса (б) для центра масс G

Далее состав попадет на горизонтальный комплекс при  $Q_2$ , на котором в результате четырехфазной перегруппировки фаз  $LQ_2+A \rightarrow B^{Q_2}+R^{Q_2}$  кристаллы A полностью израсходуются. В трехфазной области L+B+R происходит дальнейшее уменьшение доли фазы L и нарастание B и R ( $L^{en} \rightarrow B^{en(R)}+R^{en(B)}$ ). На плоскости при температуре точки тройной эвтектики E в результате реакции  $L^E \rightarrow B^E+C^E+R^E$ , фаза L полностью исчезает, и ниже остаются кристаллы B, C и R. В результате данное концентрационное поле характеризуется следующим набором микроструктурных составляющих:  $B_1^1$ ,  $B^{e(A)}$ ,  $B^{Q_2}$ ,  $R^{Q_2}$ ,  $B^{en(R)}$ ,  $R^{en(B)}$ ,  $B^E$ ,  $C^E$ ,  $R^E$ . Кристаллы A не входят в данный набор, т.к. израсходовались на более ранних этапах кристаллизации.

Для данного центра масс также рассчитаны пути кристаллизации (рис. 1а). Видно, что при прохождении двухфазной области L+B, состав расплава изменяется по продолжению прямой B-G до линии ликвидуса  $Q_1Q_2$ . Далее G попадает в область L+A+B и состав расплава перемещается по фрагменту линии ликвидуса  $Q_1Q_2$  до точки  $Q_2$ . При пересечении фазовой области L+B+R расплав движется вдоль линии ликвидуса  $Q_2E$  до точки E. Нонвариантная эвтектическая реакция происходит на горизонтальном симплексе  $B^E C^E R^E$ , являющемся верхней границей субсолидусной области B+C+R.

Аналогичным образом могут быть рассмотрены любые участки фазовой диаграммы, составлены схемы кристаллизации и проанализирован состав микроструктуры. При этом выявляются концентрационные поля как с уникальными наборами схем кристаллизации и микроструктуры, так и поля с совпадающими наборами микроструктуры.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ: № 15-43-04304 р\_Сибирь\_a, № 16-48-030851 р\_a.

#### Список публикаций

- [1] Заварицкий А.Н., Соболев В.С. Физико-химические основы петрографии изверженных горных пород. М.: Госгеолтехиздат, 1961. 383 с.
- [2] Жариков В.А. Основы физической геохимии. М.: Изд-во МГУ; Наука, 2005. 656 с.

## Исследование характеристик керамических материалов, модифицированных цеолитсодержащими породами, для промышленных предприятий

**Пасынков Михаил Валерьевич**

Казанский (Приволжский) федеральный университет

Салахов Альмир Максумович, к.т.н.

[Mike\\_p95@mail.ru](mailto:Mike_p95@mail.ru)

Широкое применение в различных сферах народного хозяйства цеолиты получили давно, однако, их использование в керамической промышленности до сих пор мало изучено. Известно положительное влияние цеолитов на бетоны и строительные смеси, при этом в керамике добавление цеолитов встречается редко. Это придаёт актуальности работе. Исследования проводились по запросу ОАО "Цеолиты Поволжья", с целью изучения возможности применения продукции предприятия в керамической промышленности.

В работе были исследованы несколько составов глин, модифицированных цеолитом торговой марки ZEOL Татарско-Шатрашанского месторождения. Использовалось только местное сырьё, реализуемое на заводах республики Татарстан. Были проведены исследования изменения фазового состава с ростом